



Wandel aktiv gestalten

## INTACT – Transparent Infrastructure for Article Charges

WissKom2016 - Der Schritt zurück als Schritt nach vorn –

Macht der Siegeszug des Open Access Bibliotheken arbeitslos?

14.-16. Juni 2016

7. Konferenz der Zentralbibliothek des Forschungszentrums Jülich

Dirk Pieper, Universitätsbibliothek Bielefeld

Kai Geschuhn, Max Planck Digital Library



Open Access macht Bibliotheken nicht arbeitslos, aber ...

Ubiquitäre Verfügbarkeit von wissenschaftlicher Information  
stellt „Geschäftsmodell“ von Bibliotheken infrage



## Who's downloading pirated papers?

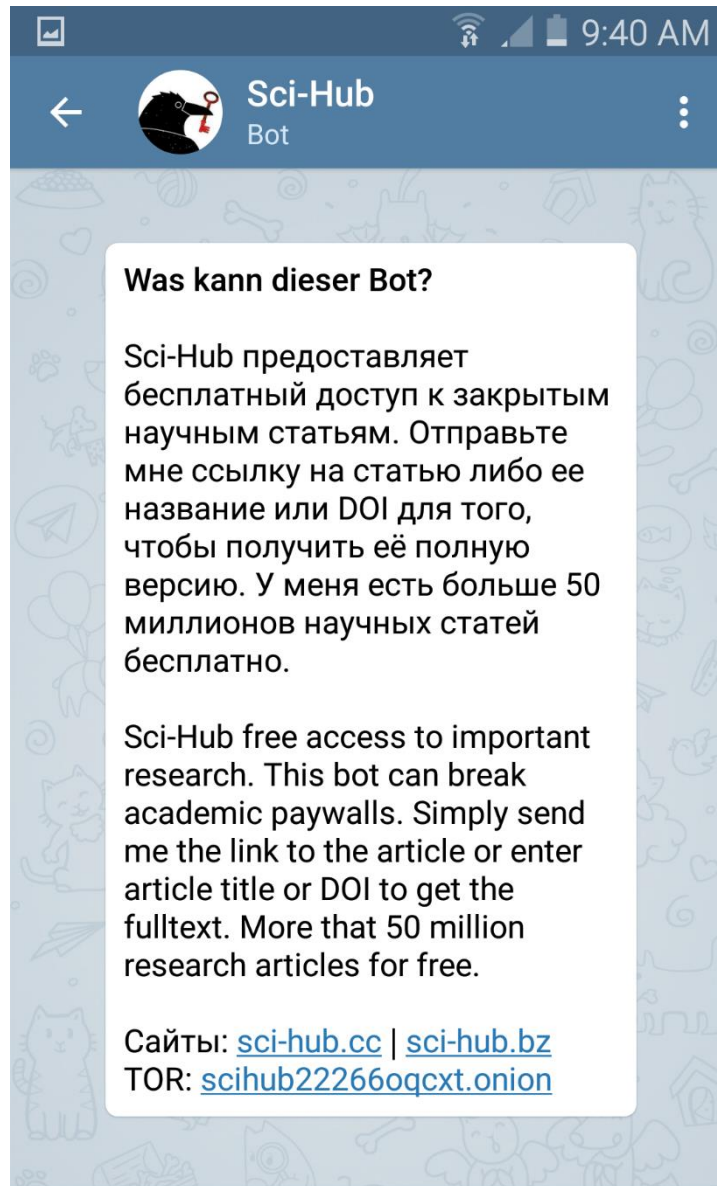
# EVERYONE

In rich and poor countries, researchers turn to the Sci-Hub website.

Sci-Hub activity hour by hour on 5 February 2016.

CREDITS: (DATA) SCI-HUB; (IMAGE/AUTOPLAY/VIDEO) ADAPTED BY J. YOU/SCIENCE

John Bohannon: Who's downloading pirated papers? Everyone, in:  
Science Mag, Apr. 28, 2016. <http://www.sciencemag.org/news/2016/04/whos-downloading-pirated-papers-everyone>



STARTEN



Sci-Hub  
Bot



TOR: [scihub22266oqcxt.onion](http://scihub22266oqcxt.onion)

2 Juni

/start 9:40 AM ✓✓

10.1016/[j.tet.2014.11.035](http://j.tet.2014.11.035) 9:46 AM ✓✓

Эта статья у меня есть! 9:46 AM

The application of formyl group  
activation of bromopyrrole  
esters to formal syntheses of  
lycogarubin C, permethyl  
storniamide A and lamellarin G  
trimethyl ether

J. T. Gupton, N. Telang, J.  
Patteson, K. Lescalleet, S.  
Yeudall, J. Sobieski, A. Harrison,  
W. Curry  
2014

9:46 AM



[gupton2014.pdf](#)

426,8 KB PDF

9:46 AM



Nachricht





# The application of formyl group activation of bromopyrrole esters to formal syntheses of lycogarubin C, permethyl storniamide A and lamellarin G trimethyl ether

John T. Gupton<sup>a</sup>, Nakul Telang, Jon Patteson, Kristin Lescalleet, Scott Yeudall, John Sobieski, Andrew Harrison, Will Curry

<sup>a</sup> Department of Chemistry, University of Richmond, Richmond, VA 23172, USA



## ARTICLE INFO

### Article history:

Received 2 October 2014

Received in revised form 10 November 2014

Accepted 11 November 2014

Available online 15 November 2014

### Keywords:

Suzuki cross-coupling

Pyrrole

Marine natural products

## ABSTRACT

Lycogarubin C, permethyl storniamide A, and lamellarin G trimethyl ether are pyrrole containing, natural products, which exhibit interesting biological properties. Such properties include anti-tumor activity on a variety of cancer cell lines including those that confer drug resistance, inhibition of HIV integrase, and vascular disrupting activity. We now describe the use of methyl and ethyl 3-bromo-2-formylpyrrole-5-carboxylate as building blocks for the formal synthesis of these three highly functionalized, bioactive pyrroles. These new building blocks will now provide ready access to the natural products and many novel analogs due to the ability to easily modify positions 2,3,4, and 5 of the pyrrole core.

© 2014 Elsevier Ltd. All rights reserved.

## 1. Introduction

We have recently reported<sup>1</sup> the use of ethyl 3-bromo-2-formylpyrrole-5-carboxylate (1) as a very flexible and efficient pyrrole building block, which allows for Suzuki cross-coupling reactions. This becomes important, since various non-activated bromopyrroles have been reported<sup>2–4</sup> to be problematic in such cross-coupling reactions. In addition to the formyl group activating these transformations, a versatile carbonyl function is also introduced at the 2-position of the pyrrole and this is common to many pyrrole containing natural products. In our recent report, we described the utilization of this strategy for the formal synthesis of the natural products polycitron A and B and polycitrin A (Scheme 1).

Lycogarubin C, permethyl storniamide A, and lamellarin G trimethyl ether (Fig. 1) also represent novel and biologically significant, pyrrole containing natural products and we now describe our use of the formyl group activation strategy for the completion of formal syntheses of these substances.

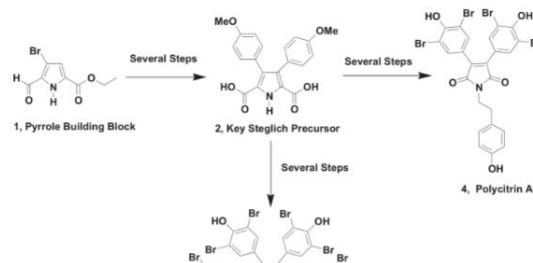
## 2. Results and discussions

Steglich<sup>5</sup> and Asakawa<sup>10</sup> simultaneously reported the isolation of various members of the lycogarubin/lycogallin acid family of natural

products from slime molds in 1994. It is interesting to note that Sherman<sup>11</sup> (2005) and Walsh<sup>12</sup> (2007) have suggested that lycogallin acid is a biosynthetic precursor to the important naturally occurring, antitumor agents rebeccamycin and staurosporin. Previous syntheses of members of the lycogarubin/lycogallin acid family of natural products have been accomplished by Steglich<sup>5</sup> (1994), Furstner<sup>2</sup> (2002), Onaka<sup>13</sup> (2006), Boger<sup>14</sup> (2010), Gribble<sup>15</sup> (2010), and more recently by Xie<sup>16</sup> (2014). The Boger and Gribble syntheses both rely on the Kornfeld-Boger ring contraction methodology to generate the pyrrole core. In the Gribble synthesis of lycogarubin C, the final precursor to the natural product was a bis-*N,N*-sulfonylated derivative of lycogarubin C and this material subsequently became our synthetic target. We initiated our synthetic strategy by preparing methyl 3-bromo-2-formylpyrrole-5-carboxylate (8) in a three step process analogous to ethyl 3-bromo-2-formylpyrrole-5-carboxylate, which we previously reported.<sup>1</sup> Such transformations proceed in very high yield with little if any purification required of the intermediate products and very significant amounts of the pyrrole building block (8) can be obtained very rapidly. It is fortunate that 1-(phenylsulfonyl)-3-indolylboronic acid pinacol ester (9) is commercially available and it was employed in our Suzuki cross-coupling reaction (Scheme 2) with our pyrrole building block (8) using reaction conditions described in our previous report.<sup>1</sup> The resulting cross-coupled product (10) was then oxidized with sodium chlorite in water/DMSO to produce the corresponding acid (11) in good yield. Subsequent treatment of this acid

<sup>a</sup> Corresponding author. Tel.: +1 804 287 6498; fax: +1 804 287 1897; e-mail address: [jgupton@richmond.edu](mailto:jgupton@richmond.edu) (J.T. Gupton).

<http://dx.doi.org/10.1016/j.tet.2014.11.035>  
0040-4020/© 2014 Elsevier Ltd. All rights reserved.





## Rahmenbedingungen

Wissenschaftliche Information ist im hohen Maße frei verfügbar über Repositorien, soziale Netzwerke, illegale Plattformen ...

Zielsetzung von Wissenschaftspolitik und Forschungsförderern:  
Open Science



Ende des Subskriptionsmodells

Verknappungsstrategie der Verlage mit den herkömmlichen Subskriptions- und Lizenzmodellen ist obsolet geworden

Bibliotheken werden ihre Services noch stärker an die Erzeugung des Publikations- und Daten-Outputs ihrer Institution ausrichten müssen





„Dass mittels SciHub inzwischen mehr als 48 Millionen bislang eingesperrter Aufsätze zwar illegal, aber viel einfacher und vollständiger als über jeden Bibliothekskatalog zur Verfügung stehen, macht die Absurdität der bisherigen Situation noch deutlicher. Das dahinter liegende Nutzungsprinzip ist ebenso einfach wie genial, und wenn ein SciHub schließt, so kann der nächste unproblematisch geöffnet werden. Bibliotheken, die in den letzten Jahren nolens volens zu Erfüllungsgehilfen der Verlage und zu Betreibern von komplizierten Authentifizierungs-Lösungen geworden sind, die eine Nutzung eher verhindern statt sie zu ermöglichen, fragen sich zu Recht, warum es ausgerechnet ihre Aufgabe sein soll, in einer SciHub-Welt die Paywalls der Verlage zu stützen und den Zugang zur Literatur einzuschränken. Und das häufig zu Konditionen, die nicht einmal erlauben, die lizenzierten Artikel auf einem eigenen Server aufzulegen und zu hosten. Dass Wissenschaftler den illegalen Weg zur Literatur wählen, ist letztlich nur logisch, wenn ihre eigenen Infrastruktureinrichtungen sie nicht so gut versorgen können wie Schattenbibliotheken.“

Konstanze Söllner: Blockierer, Kriminelle und ein Vorschlag der Max Planck Digital Library, in: b.i.t.online, [http://www.b-i-t-online.de/heft/open\\_access\\_2.php](http://www.b-i-t-online.de/heft/open_access_2.php)



Neue Infrastruktur erforderlich

Finanzierung des Publikations-Outputs statt Lizenzen und Subskriptionen erfordert neue Infrastruktur für die wissenschaftliche Informationsversorgung

# INT@CT

—  
*open @PC* → Reporting und Transparenz

—  
*ES@C* → Prozesse, Standards, Anforderungen

—  
*O@analytics* → Datenevidenz, Modellierung



About

Blog

Open APC

ESAC

OA analytics

Contact

Imprint



INTACT on  
Twitter



INTACT on  
Github  
#137 bremen apc  
data 2011-2016  
(2016-06-14)



APC Treemap  
Visualisations



## Transparent Infrastructure for Article Charges

INTACT aims at establishing transparent and efficient procedures to manage article processing charges (APC) for open access publications. The project is based on the understanding that the transition from a subscription based market towards open access can only be achieved if higher education and research institutions and their libraries collaborate and work with publishers on both parameters and lean workflows.

To this end, the project addresses three aspects: First, INTACT will examine how open access publishing is distributed over German research institutions. This will form the basis to predict future costs. Second, an open data service for article charges will be established. These datasets on fee-based publishing can be reused to make cash flows between research institutions and publishers more transparent. Finally the project looks at the business processes of the evolving apc market and proposes efficient workflows while involving all parties such as funders, libraries, and publishers.

The project collaborates closely with universities, research institutions and publishers. It combines the three initiatives

- *open@PC*
- *ES@C*
- *OA analytics*

Project partners are the [Bielefeld University Library](#), the [Institute for Interdisciplinary Studies of Science \(I<sup>2</sup>SoS\)](#) and the [Max Planck Digital Library](#). INTACT started in October 2015 receiving a three-year funding from the [German Research Foundation \(DFG\)](#).

## APC Geschäftsmodell

– Praxis und Herausforderungen?

Bestandsaufnahme im Rahmen des INTACT-Projektes,  
Fokus auf:

- Betreiber der DFG-Publikationsfonds
- Praxis an der MPDL
- “Offsetting-Anwender“

## Herausforderung I:

### Finanzierung

- Nachhaltige finanzielle Absicherung der Fonds schwierig, v.a. in zweischichtigen Bibliothekssystemen
- Zusammenführung der Erwerbungsmittel notwendig
- Überblick über die Gesamtheit der Zahlungen an einen Verlag erforderlich: Subskriptionen, APCs, Hybrid-APCs, Page Charges, Sonderdrucke usw.

## Herausforderung II:

### Publikationsdatenanalyse

- Zur Abschätzung d. Finanzbedarfs werden Kenngrößen über den Publikationsoutput einer Institution benötigt
- Zugang zu Datenbanken wie Web of Science, Scopus erforderlich, Harmonisierung von Institutionenansetzungen

## Herausforderung III:

### Verfahren der Kostenübernahme

- Erstattung v. Einzelrechnungen an Autorinnen, Prepayment, Rahmenverträge → Skalierbarkeit der Prozesse entscheidend
- Prepayment/ Vorauszahlungsmodelle oft problematisch (haushaltsrechtlich und budget-technisch)
- Rahmenverträge für kleinere Einrichtungen oft nicht durchzusetzen
- Rabatte problematisch (Kostentransparenz)



## Herausforderung IV:

Autorenidentifikation (Zuordnung der Autoren zur zahlenden Einrichtung durch den Verlag)

- Fehlerhafte Zuordnung der Autoren erzeugt hohen Aufwand
- Verfahren der Autorenerkennung noch nicht standardisiert & automatisiert
- „Dashboards“/ Administratoren-Portale der Verlage bieten nicht die erforderlichen Funktionalitäten

## Herausforderung V:

### Rechnungslegung

- Mangelnde Konformität der Rechnungen mit deutschen haushaltsrechtlichen Anforderungen (zu kurze Zahlungsziele, fehlende VAT)
- Fehlende Angaben zur Rechnungsprüfung (z.B. Preis- und rabattinformationen, Artikel-Metadaten)

## Herausforderung VI:

### Reporting & Transparenz

- Berichtspflicht gegenüber Förderern und Hochschulleitung erfordert Datenkenntnis über die finanzierten Artikel
- Workflows und Tools für die Veröffentlichung und Aggregation der Ausgaben werden benötigt, um erneuter Marktinstanztransparenz vorzugreifen

<http://treemaps.intact-project.org/>

The Open APC initiative releases datasets on fees paid for Open Access journal articles by universities and research institutions under an Open Database License.

Select a state from the map or use the list below to view APC data for individual institutions or inspect the [full dataset](#).



The 20 key providers of the Max Planck Society make up >80% of the article output

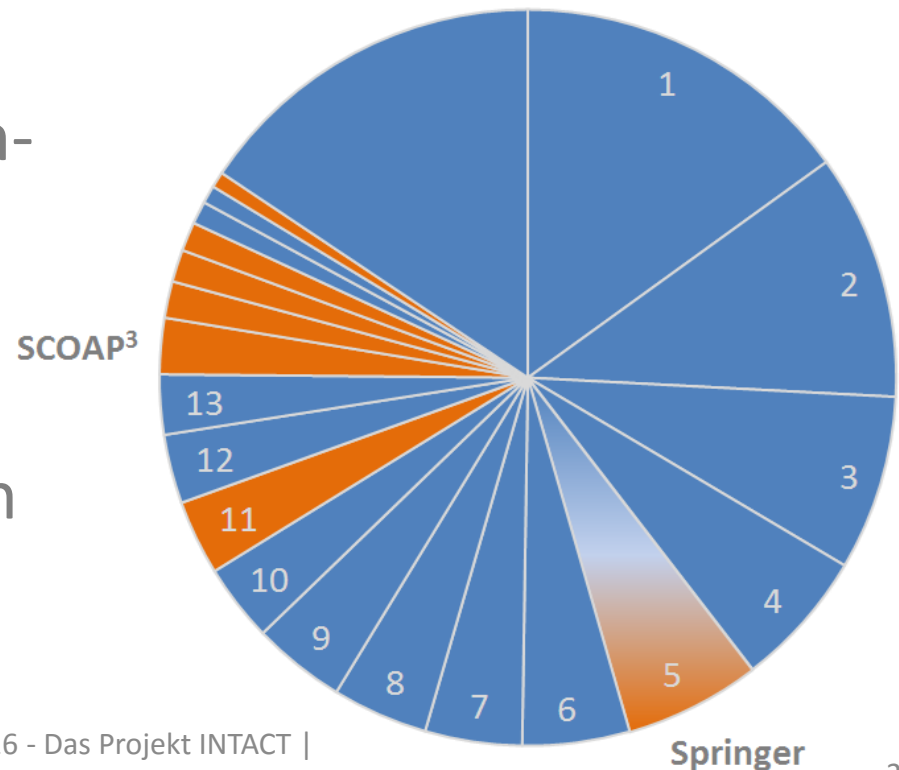
Blue: commercial & society publisher

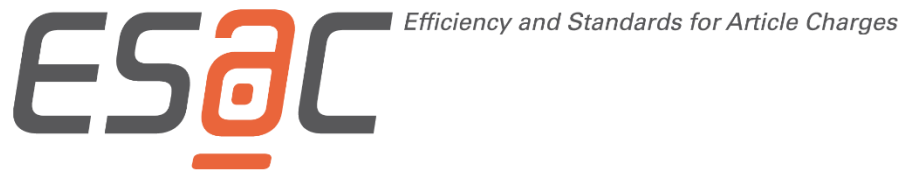
Orange: OA publisher

## 0@analytics

Beispiel Publikationsdatenanalyse zur Kostenprojektion und zur Modellierung von Transformations-szenarien auf Verlags-Ebene

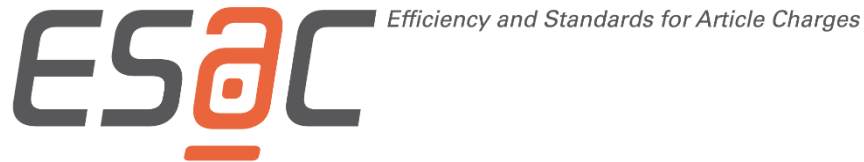
**MPG publications by provider / OA Gold**  
articles and reviews in Web of Science 2014





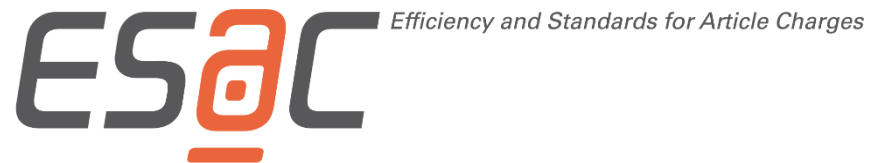
## Herausforderungen Offsetting-Verträge

- Mangelnde Verankerung d. Transformation
- Heterogene Vertragsmechanismen
- Steigende Kosten
- Schlechte Datenkenntnis



ESAC released „Joint Understanding of Offsetting“

- Offset deals are **pilot models**.
- They should lead to a proper open access model. This includes to **fully omitting subscription costs**.
- They must **lead to a “pay as you publish” agreement**.



Weitere Referenzdokumente in Planung, z.B.

- How-To für Publikationsfondsbetreiber
- Anforderungen an Open-Access-Verlage





## Ausblick

- Traditionelle Bibliotheksservices verlieren an Bedeutung
- Bibliotheken haben eine Schlüsselrolle in der Transformation des Subskriptionsmodells zu Open Access
- Notwendigkeit einer Neuausrichtung ihres Serviceportfolios



INTACT Team:

I2SoS: Christine Rimmert, Mathias Winterhager,  
Michael  
Wohlgemuth

Bielefeld UL: Christoph Broschinski, Najko Jahn, Vitali  
Peil, Dirk Pieper

MPDL: Kai Geschuhn, Ralf Schimmer, Adriana Sikora





[www.intact-project.org](http://www.intact-project.org)

Follow us: @oa\_intact